

ОСОБЕННОСТИ ПЛАСТИЧЕСКОЙ ДЕФОРМАЦИИ ВБЛИЗИ СИММЕТРИЧНЫХ ГРАНИЦ НАКЛОНА В Ni_3Al

Мартынов А.Н., Поletaев Г.М., Ракитин Р.Ю., Ивахин М.П.

Руководители – проф., д.ф.-м.н. Громов В. Е.

ГОУ ВПО «Сибирский государственный индустриальный университет»,

г. Новокузнецк, gromov@physics.sibsiu.ru

проф., д.ф.-м.н. Старостенков М.Д.

ГОУ ВПО «Алтайский государственный технический университет»,

г. Барнаул, genphys@mail.ru

В настоящей работе методом молекулярной динамики изучены механизмы пластической деформации вблизи симметричных границ зерен наклона $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ в интерметаллиде Ni_3Al в условиях одноосной деформации. Границы наклона создавались посредством поворота двух кристаллов Ni_3Al относительно друг друга на угол разориентации θ вокруг осей $\langle 111 \rangle$ или $\langle 100 \rangle$. Количество атомов в расчетном блоке составляло от $2 \cdot 10^5$ до $5 \cdot 10^5$. Оси координат были взяты следующими: ось X – перпендикулярно плоскости межзеренной границы вглубь одного из зерен; Y – вдоль границы зерна и перпендикулярно, а Z – вдоль оси наклона.

Одноосная деформация задавалась путем изменения соответствующих межатомных расстояний в стартовой конфигурации расчетного блока. В работе рассматривались деформации вдоль осей X, Y и Z. Продолжительность молекулярно-динамических экспериментов составляла 0,1...0,2 нс, в течение которых температура расчетного блока оставалась постоянной. При малых значениях стартовой деформации в основном реализовывалось зернограничное проскальзывание, при котором происходили смещения атомов вдоль границы зерен. Сильная деформация сжатия вдоль осей Y и Z приводила к расщеплению зернограничных дислокаций и миграции границы, а деформация растяжения, за счет увеличения избыточного свободного объема, приводила к образованию аморфной структуры в области границы зерен. При расщеплении зернограничной дислокации в бикристалле Ni_3Al в зерно испускалась частичная дислокация, в результате чего в зерне возникала антифазная граница.

При больших значениях стартовой деформации сжатия и растяжения ($|\epsilon| \approx 7...9\%$ в зависимости от параметров границы зерен) происходило интенсивное испускание с границы зерна комплекса дислокаций, что приводило к образованию структуры, состоящей из множества разориентированных относительно друг друга вдоль плотноупакованных плоскостей кристаллических кластеров. При высоких значениях стартовой деформации растяжения в границах $\langle 111 \rangle$ и $\langle 100 \rangle$ ($\epsilon > 9\%$) внутризеренное скольжение и зернограничное проскальзывание были менее выражены на фоне разрушения кристаллической структуры вблизи межзеренной границы с образованием аморфной области.